

**A COMPUTATIONAL STUDY OF VACANCY DEFECT EFFECTS ON
THE STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF
A LEAD-FREE PEROVSKITE MATERIAL Cs₂InCoF₆**

SULTHAN WALIID ANGGARA WISESA
22/501234/PPA/06382

ABSTRACT

Vacancy defects alter various properties in a perovskite material. This study aims to investigate the effects of atomic vacancy defects (Cs-defect, In-defect, Co-defect, and F-defect) on the lead-free halide perovskite Cs₂InCoF₆, focusing on how the vacancy defects impact the material's structure and electronic properties. The density functional theory (DFT) based calculations were done to comprehensively evaluate the impact on bond lengths, bond angles, formation energies, and electronic band structures of defective structures compared to pristine Cs₂InCoF₆. Also, the charge transition levels of the perovskite were calculated to show the potential of these defects to create deep trap states.

Structural analysis shows that the bond lengths and angles are slightly distorted when a vacancy is introduced into the double perovskite structure, resulting in disruption of the octahedral coordination symmetry around the B-site cation. Among the defects, Cs-defect (A-site vacancy) causes the most structural distortion, highlighting the importance of the A-site cation in the structural integrity of perovskite. The calculated formation energies for Cs-defect, In-defect, Co-defect, and F-defect are 4.25, 2.70, -6.31, and 2.90 eV, respectively, indicating that the formation of most defects is energetically unfavorable (endothermic) except for the Co-defect. The negative formation energy of the Co-defect suggests it could form spontaneously in practical processing. The calculated electronic band structure shows that these vacancy defects potentially enhance light absorption, indicated by the reduced band gap from 2.35 eV (pristine) to 2.12, 0.89, 1.83, and 2.12 eV (Cs-defect, In-defect, Co-defect, and F-defect, respectively). Additionally, the charge transition level study indicates that these defects are unlikely to introduce deep trap states, revealing the defect tolerance properties in Cs₂InCoF₆.

Keywords: DFT, lead-free perovskite, vacancy defects

**STUDI KOMPUTASI PENGARUH CACAT KEKOSONGAN
TERHADAP STRUKTUR DAN SIFAT ELEKTRONIK
PEROVSKIT BEBAS TIMBAL Cs₂InCoF₆**

SULTHAN WALIID ANGGARA WISESA
22/501234/PPA/06382

INTISARI

Cacat kekosongan (*vacancy defect*) diketahui mampu mengubah berbagai sifat pada material perovskit. Penelitian tesis ini bertujuan untuk mempelajari pengaruh cacat kekosongan atomik (cacat-Cs, cacat-In, cacat-Co, dan cacat-F) pada perovskit halida bebas timbal Cs₂InCoF₆ yang berfokus pada bagaimana kecacatan tersebut memengaruhi struktur dan sifat elektronik material perovskit. Perhitungan berbasis teori fungsi kerapatan (*density functional theory*, DFT) dilakukan untuk mengevaluasi dampak cacat kekosongan pada panjang ikatan, sudut ikatan, energi pembentukan, dan pita elektronik pada perovskit Cs₂InCoF₆ akibat suatu kecacatan atomik. Adapun, perhitungan tingkat transisi muatan (*charge transition levels*) juga dilakukan untuk menunjukkan kemampuan pembentukan *trap states* akibat suatu kecacatan atomik pada perovskit Cs₂InCoF₆.

Analisis struktur menunjukkan bahwa cacat kekosongan menyebabkan panjang ikatan dan sudut ikatan terdistorsi, sehingga simetri koordinasi oktahedral rusak di sekitar kation situs B. Di antara cacat kekosongan yang diteliti, cacat-Cs (kekosongan pada situs A) menyebabkan distorsi struktur yang paling signifikan. Hal tersebut menegaskan peran penting kation situs A dalam menjaga keadaan utuh struktur perovskit. Hasil perhitungan energi pembentukan untuk cacat-Cs, cacat-In, cacat-Co, dan cacat-F berturut-turut adalah 4,25; 2,70; -6,31; dan 2,90 eV menunjukkan bahwa hampir semua pembentukan cacat kekosongan pada material perovskit ini adalah suatu proses endotermik kecuali untuk cacat-Co. Nilai negatif pada energi pembentukan cacat-Co mengindikasikan bahwa cacat tersebut dapat terbentuk secara spontan selama proses sintesis. Struktur pita elektronik yang diperoleh dari perhitungan menyatakan bahwa cacat kekosongan dapat meningkatkan absorpsi cahaya yang ditunjukkan dari penurunan celah pita dari 2,35 eV (tanpa cacat) menjadi 2,12; 0,89; 1,83; dan 2,12 eV (cacat-Cs, cacat-In, cacat-Co, dan cacat-F, secara berurutan). Selain itu, hasil perhitungan tingkat transisi muatan menunjukkan bahwa Cs₂InCoF₆ memiliki sifat toleransi terhadap kecacatan yang ditandai oleh kecenderungannya untuk tidak membentuk perangkap (*trap states*) yang dalam.

Kata kunci: cacat kekosongan, DFT, perovskit bebas timbal